

イオン液体ナノ薄膜におけるイオン伝導：実験と MD シミュレーション

Experimental and MD simulation study of ionic conduction behavior in ionic liquid nano thin films

東北大院工¹, 東北大金研² °丸山 伸伍¹, Ida Bagus Hendra Prastiawan², 鳥屋部 果穂¹,
樋口 祐次², 久保 百司², 松本 祐司¹

Tohoku Univ.¹, IMR Tohoku Univ.², °Shingo Maruyama¹, Ida Bagus Hendra Prastiawan²,
Toyabe Kaho¹, Yuji Higuchi², Momoji Kubo², Yuji Matsumoto¹

E-mail: maruyama-s@tohoku.ac.jp

【背景】固体基板と接したイオン液体は、基板との相互作用によって、バルクとは異なる構造や物性が発現することが報告されている[1]。これまでの研究が、主にバルク液体に埋もれた固液界面を界面選択的な手法で観察するというものであったのに対し、我々は濡れ性向上処理を施したサファイア単結晶基板上にイオン液体をナノレベルで薄膜化し、固液界面付近のイオン液体のみを取り出してその構造や物性を明らかにするというアプローチを試みてきた[2]。本発表では、薄膜実験と分子動力学(MD)シミュレーションを組合せて、イオン液体ナノ薄膜における界面液体構造と、表面や界面の存在がイオン伝導物性に与える影響を調べた結果を報告する。

【実験】原子レベルで平坦なサファイア(0001)基板上にくし型電極を真空蒸着により作製した。その後、大気中でイオン液体 [emim][TFSA] をくし型電極部に滴下し、高真空中 300 °C で 20 分間加熱して蒸発させた。この処理により、イオン液体の濡れ性が大幅に向上することが分かっている[2]。この基板上に赤外レーザ蒸着法を用いて [emim][TFSA] を室温で真空蒸着し、イオン伝導度を交流インピーダンス法により基板温度を変えながら測定した。さらに、異なる膜厚・温度における MD シミュレーションを行い、Nernst-Einstein 式に基づいて伝導度を算出した。

【結果と考察】イオン液体薄膜の伝導度の温度依存性は Vogel-Fulcher-Tammann(VFT)式 $\sigma = \sigma_0 \exp(E_a/k_B(T-T_0))$ を用いてフィッティングを行い、前指数因子 σ_0 と活性化エネルギー E_a 項と V-F 温度 T_0 を求めた(Fig.1)。これらのパラメータの膜厚依存性について、実験とシミュレーションは同様の傾向(太線: ガイドライン)を示しており、この傾向は表面/界面における分子の配位数の低下とその変動の増加[3]を考慮することで理解できる。

【参考文献】 [1] Hayes et al., Chem. Rev. 115, 6357 (2015). [2] 丸山他, 第 75 回応物秋季学術講演会, 北海道大学, 18a-A11-2 (2014)., 第 62 回応物春季学術講演会, 11a-D8-2, 東海大学(2015). [3] Ikeda et al., J. Non. Cryst. Solids 371, 53–57 (2013). [4] Tokuda et al., J. Phys. Chem. B 109, 6103 (2005)., Bulut et al., ChemPhysChem 12, 2296 (2011)., Schreiner et al., J. Chem. Eng. Data 55, 1784 (2010)., Hofmann et al., Int. J. Mol. Sci. 17, 670 (2016).

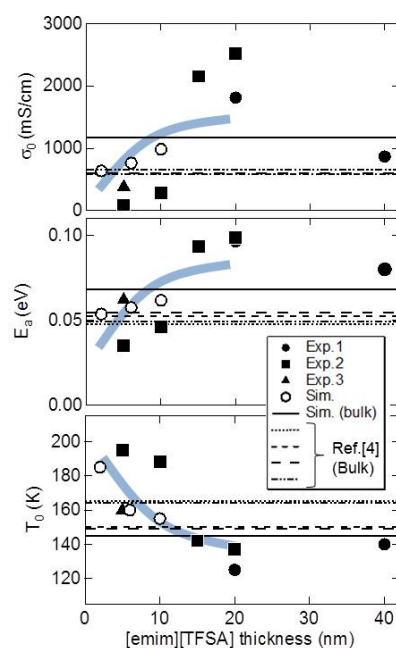


Fig.1 [emim][TFSA] ナノ薄膜の VFT パラメータの膜厚依存性。